

# 1.3 Strahlung als Störung [Sakurai 5.7]

- Das Ziel sei jetzt: (i) ein elektromagnetisches Feld als Störung ( $\hat{V}$ ) einzuführen;  
 (ii) damit eine physikalische Anwendung der Fermi-Regel durchzuarbeiten;  
 (iii) anschließend noch einige „Probleme“ des Verfahrens zu betrachten.

## (i) Geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Theorie I: Potentiale:  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  ;  $\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \dot{\vec{A}}$   
 Eichtransformation:  $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$  ;  $\phi' = \phi - \frac{1}{c} \dot{\chi}$   
 Eichbedingungen:  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$  (Coulomb) ;  $\frac{1}{c} \dot{\phi} + \nabla \cdot \vec{A} = 0$  (Lorenz)  
 Lorentz-Kraft:  $\vec{F}_L = q \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$

Welche Lagrange-Funktion  $L$  und Hamilton-Funktion  $H$  braucht man in der klassischen Mechanik, um  $\vec{F}_L$  wiederherzustellen?

Behauptung:  $L = \frac{m\vec{v}^2}{2} - q \left( \phi - \frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A} \right)$

Beweis:  $\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \left( \partial_i \phi - \frac{v_j}{c} \partial_i A_j \right)$  ;  $\frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + \frac{q}{c} A_i$

$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v_i} \right) = mv_i + \frac{q}{c} (v_j \dot{A}_j + \dot{A}_i A_i)$

$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial x_i} \Rightarrow mv_i = q \left( \underbrace{-\partial_i \phi - \frac{1}{c} \dot{A}_i A_i}_{E_i} + \underbrace{\frac{v_j}{c} (\partial_i A_j - \partial_j A_i)}_{\frac{1}{c} \epsilon_{ijm} \epsilon_{mkl} v_j \dot{A}_k A_l} \right) = \left[ \frac{\vec{v}}{c} \times (\nabla \times \vec{A}) \right]_i$

Behauptung:  $H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\phi$

Beweis:  $H = \sum_i v_i \frac{\partial L}{\partial v_i} - L = \sum_i \left\{ mv_i^2 + \frac{q}{c} v_i A_i - \frac{mv_i^2}{2} + q\phi - \frac{q}{c} v_i A_i \right\}$   
 $= \frac{m\vec{v}^2}{2} + q\phi$  ;  $p_i := \frac{\partial L}{\partial v_i} = mv_i + \frac{q}{c} A_i \Rightarrow$

Quantenmechanisch: Setze  $\vec{p} \rightarrow \hat{p}$ ,  $\vec{x} \rightarrow \hat{x}$  und behalte (Begründung folgt später) „natürliche“ Ordnung: (Kap. 3)

$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{x}, t) \right) \cdot \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}(\hat{x}, t) \right) + q\phi(\hat{x}, t)$   
 $= \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}^2 - \frac{q}{c} \left\{ \hat{p} \cdot \vec{A}(\hat{x}, t) + \vec{A}(\hat{x}, t) \cdot \hat{p} \right\} + \frac{q^2}{c^2} \vec{A}^2(\hat{x}, t) \right] + q\phi(\hat{x}, t)$

In der Ortsdarstellung:  $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$

Der „Antikommutator“ ist nichttrivial:

$\langle \hat{x} | \hat{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{p} | \Psi \rangle = -i\hbar \nabla \cdot (\vec{A} \Psi) + \vec{A} \cdot (-i\hbar \nabla \Psi)$   
 $= -i\hbar (\nabla \cdot \vec{A}) \Psi + 2\vec{A} \cdot (-i\hbar \nabla \Psi)$

↑  
verschwindet in Coulomb-Eichung

Fazit:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\hat{x}, t)$  ;  $\hat{V}(\hat{x}, t) = -\frac{q}{2mc} \left[ \hat{p}, \vec{A}(\hat{x}, t) \right] - \frac{q}{mc} \vec{A}(\hat{x}, t) \cdot \hat{p} + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2(\hat{x}, t) + q\phi(\hat{x}, t)$

(ii) Anwendung: Geladenes Teilchen in ebener Welle

Theorie I:  $\vec{E}(\vec{x},t) = \vec{\lambda} \operatorname{Re} [e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}]$  ;  $\omega := c|\vec{k}|$   
 (Spezialfall)  $\vec{B}(\vec{x},t) = \vec{n} \times \vec{\lambda} \operatorname{Re} [e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}]$  ;  $\vec{n} := \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$  ;  $\vec{n}\cdot\vec{\lambda} = 0$

Darstellung:  $\phi(\vec{x},t) = 0, \vec{A}(\vec{x},t) = \vec{\lambda} \operatorname{Re} [\frac{c}{i\omega} e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}]$  ;  $\frac{c}{\omega} = \frac{1}{|\vec{k}|}$   
 $(\nabla \times \vec{A} = \vec{k} \times \vec{\lambda} \operatorname{Re} [\frac{c}{\omega} e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}] ; \nabla \cdot \vec{A} = \vec{k} \cdot \vec{\lambda} \operatorname{Re} [\frac{c}{\omega} e^{-i\omega t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}] = 0)$   
 $\frac{\vec{k}c}{\omega} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} = \vec{n}$  ;  $\frac{\vec{k}c}{\omega} = \vec{n}$

Sei  $|\vec{\lambda}|$  „klein“; der quadratische Term kann dann vernachlässigt werden, und  
 $\hat{V}(\hat{x},t) = -\frac{q}{mc} \cdot \frac{c}{\omega} \cdot \sin(\vec{k}\cdot\hat{x} - \omega t) \vec{\lambda} \cdot \hat{p}$ .

Die Herleitung läuft wie früher (Seite 8/9); einziger Unterschied ist, daß  $\langle f_I | \hat{V}_I(t_1) | i_I \rangle$  zusätzliche Zeitabhängigkeit besitzt:

$$\langle f_I | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\hat{x} - i\omega t_1} - e^{-i\vec{k}\cdot\hat{x} + i\omega t_1}}{2i} \cdot \vec{\lambda} \cdot \hat{p} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} | i_I \rangle$$

$$= \frac{1}{2i} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i - \hbar\omega) t_1} \langle f_I | e^{i\vec{k}\cdot\hat{x}} \vec{\lambda} \cdot \hat{p} | i_I \rangle - e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i + \hbar\omega) t_1} \langle f_I | e^{-i\vec{k}\cdot\hat{x}} \vec{\lambda} \cdot \hat{p} | i_I \rangle \right\}$$

vgl. Aufgabe 2.2

Sei  $E_f > E_i$  („Absorption“); nur der erste Term gibt einen Beitrag, und

$$\Gamma_{fi}^{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{q}{2m\omega} \right)^2 |\langle f_I | e^{i\vec{k}\cdot\hat{x}} \vec{\lambda} \cdot \hat{p} | i_I \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

Dividiert man durch die ursprüngliche (zeitgemittelte) Energiestromdichte,

Theorie I:  $\langle \vec{S} \rangle = \frac{c}{8\pi} |\vec{\lambda}|^2 \vec{n}$ ,

bekommt man einen „Absorptionsquerschnitt“ (vgl. Seite 10):

$$\sigma_{fi}^{abs} := \frac{\hbar\omega \Gamma_{fi}^{abs}}{|\vec{S}|} = \frac{4\pi^2 q^2}{m^2} \cdot \frac{1}{\omega c} |\langle f_I | e^{i\vec{k}\cdot\hat{x}} \frac{1}{|\vec{\lambda}|} \vec{\lambda} \cdot \hat{p} | i_I \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

$\vec{e}_\lambda$  (Polarisationsvektor)

Bemerkungen: \* Nur  $\frac{\vec{\lambda}}{|\vec{\lambda}|}$  taucht auf, d.h.  $\sigma_{fi}^{abs}$  ist eine Eigenschaft

der „Licht-Materie-Wechselwirkung“, aber unabhängig von der Intensität der ursprünglichen Strahlung.

\* Weitere Vereinfachungen möglich, z.B.  $\vec{k}$  „klein“ (große Wellenlänge) sowie

$$\frac{\hat{p}}{m} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}_0]$$

$$\langle f_I | [\hat{x}, \hat{H}_0] | i_I \rangle = (E_i - E_f) \langle f_I | \hat{x} | i_I \rangle$$

$$\Rightarrow \sigma_{fi}^{abs} \approx 4\pi^2 \frac{q^2}{\hbar c} \omega |\langle f_I | \frac{\hat{p}}{m} \cdot \hat{x} | i_I \rangle|^2 \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar} - \omega\right)$$

„Dipolnäherung“

\*  $|i_I\rangle =$  gebundener Zustand,  $|f_I\rangle =$  Streuzustand  $\Rightarrow$  Photoeffekt.  
 (Aufgabe 2.3)

ciii) Über den Gültigkeitsbereich der zeitabhängigen Störungstheorie [Sakurai 5.5]

Um die Konvergenz der Störungsreihe zu prüfen wird ein System betrachtet, welches auch exakt lösbar ist. Sei (vgl. Aufgabe 1.3)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

$$\hat{H}_0 := \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} ; \quad \hat{V}(t) := \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

Das System sei bei  $t=0$  im Zustand  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Welche ist die Übergangsrate in den Zustand  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ?

Erste Ordnung

Wie auf Seite 8:

$$\begin{aligned} & \langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle \\ & \approx (0 \ 1) \left| \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \right| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 (0 \ 1) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t_1} \\ \delta e^{-i\omega t_1} & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (\alpha - \alpha) t_1} (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t_1} \\ \delta e^{-i\omega t_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & = -\frac{i\delta}{\hbar} \int_0^t dt_1 e^{-i\omega t_1} = \frac{\delta}{\hbar\omega} [e^{-i\omega t} - 1] = \frac{-2i\delta e^{-\frac{i\omega t}{2}}}{\hbar\omega} \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \end{aligned}$$

Übergangswahrscheinlichkeit:  $P_{fi} = |\langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle|^2 = \frac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$

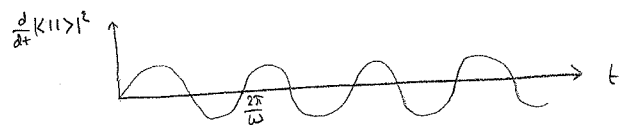
Übergangsrate:  $W_{fi} = \frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle|^2 = \frac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2} \cdot 2 \cdot \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cdot \frac{\omega}{2}$   
 $= \frac{2\delta^2}{\hbar^2\omega} \sin(\omega t)$

Wie auf Seite 8:  $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin(\omega t)}{\pi\omega} = \delta(\omega)$ ;  $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle|^2 = \frac{2\pi\delta^2}{\hbar^2} \delta(\omega)$

Bemerkungen:

\*  $\omega \neq 0$

Übergangsrate selbst ist endlich:



Trotzdem  $\lim_{t \rightarrow \infty} W_{fi} = 0$  im Sinne einer Distribution in der Variable  $\omega$ . (vgl. Seite 8).

\*  $\omega = 0$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\sin(\omega t)}{\omega} = t$$

$\Rightarrow$  Übergangsrate wächst mit Zeit:  $\frac{d}{dt} |\langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle|^2 = \frac{2\delta^2 t}{\hbar^2}$

$\Rightarrow$  Übergangswahrscheinlichkeit divergiert:  $|\langle f_I | \hat{U}_I(t; 0) | i_I \rangle|^2 = \frac{\delta^2 t^2}{\hbar^2}$

$\Rightarrow$  „Verletzung der Unitarität“ für  $t \geq \frac{\hbar}{\delta}$  ↗

$$\hat{V}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\omega t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\omega t}{\hbar}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\omega t}{\hbar}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\omega t}{\hbar}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

Ansatz:  $\hat{U}_I(t;0) = \begin{pmatrix} e(t) & f(t) \\ g(t) & h(t) \end{pmatrix}$

Bewegungsgleichung:  $i\hbar \begin{pmatrix} \dot{e} & \dot{f} \\ \dot{g} & \dot{h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \delta e^{i\omega t} \\ \delta e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g\delta e^{i\omega t} & h\delta e^{i\omega t} \\ e\delta e^{-i\omega t} & f\delta e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} i\hbar \dot{e} = g\delta e^{i\omega t} \\ i\hbar \dot{g} = e\delta e^{-i\omega t} \end{cases} \quad \& \quad \begin{cases} i\hbar \dot{f} = h\delta e^{i\omega t} \\ i\hbar \dot{h} = f\delta e^{-i\omega t} \end{cases}$$

Sei  $\tilde{h} = h e^{i\omega t} \Rightarrow \dot{\tilde{h}} = \dot{h} e^{i\omega t} + i\omega h e^{i\omega t} = \frac{\delta}{i\hbar} f + i\omega \tilde{h}$

$$\Rightarrow \ddot{\tilde{h}} = \frac{\delta}{i\hbar} \dot{f} + i\omega \dot{\tilde{h}} = -\frac{\delta^2}{\hbar^2} \tilde{h} + i\omega \dot{\tilde{h}}$$

$$\Leftrightarrow \ddot{\tilde{h}} - i\omega \dot{\tilde{h}} + \frac{\delta^2}{\hbar^2} \tilde{h} = 0 \quad \text{lineare DG 2. Ordnung!}$$

Charakteristische Gleichung:  $\tilde{h} = e^{\alpha t}, \alpha \in \mathbb{C}$

$$\Rightarrow (\alpha^2 - i\omega\alpha + \frac{\delta^2}{\hbar^2}) = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{i\omega}{2} \pm \sqrt{\frac{-\omega^2}{4} - \frac{\delta^2}{\hbar^2}} = \frac{i\omega}{2} \pm i\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}}$$

Allgemeine Lösung:  $h = \tilde{h} e^{-i\omega t} = e^{-\frac{i\omega t}{2}} [c_1 \cos(t\Gamma) + c_2 \sin(t\Gamma)]$

$$\Leftrightarrow f = \frac{i\hbar}{\delta} e^{i\omega t} \dot{h} = \frac{\hbar\omega}{2\delta} e^{\frac{i\omega t}{2}} [c_1 \cos(t\Gamma) + c_2 \sin(t\Gamma)] + \frac{i\hbar}{\delta} \Gamma e^{\frac{i\omega t}{2}} [-c_1 \sin(t\Gamma) + c_2 \cos(t\Gamma)]$$

Folglich:  $e = e^{\frac{i\omega t}{2}} \cdot \frac{\hbar}{\delta} \left[ \left(\frac{\omega}{2} c_1 + i\Gamma c_2\right) \cos(t\Gamma) + \left(\frac{\omega}{2} c_2 - i\Gamma c_1\right) \sin(t\Gamma) \right]$   
 $(f \rightarrow e, h \rightarrow g) \quad g = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \left[ c_1 \cos(t\Gamma) + c_2 \sin(t\Gamma) \right]$

Anfangsbedingungen:

$$\begin{cases} e(0) = 1 \\ g(0) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 1 = \frac{\hbar}{\delta} \left(\frac{\omega}{2} c_1 + i\Gamma c_2\right) \\ 0 = c_1 \end{cases} \Rightarrow c_2 = \frac{\delta}{i\hbar\Gamma}$$

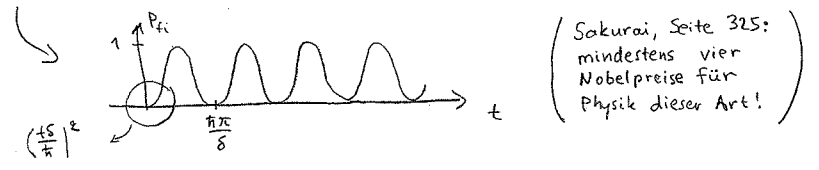
$$\Rightarrow g(t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \cdot \frac{\delta}{i\hbar\Gamma} \cdot \sin(t\Gamma)$$

Übergangswahrscheinlichkeit:  $P_{fi} = |c_{01} \hat{U}_I(\frac{1}{0})|^2 = |g(t)|^2 = \frac{\delta^2/\hbar^2}{\omega^2/4 + \delta^2/\hbar^2} \sin^2\left(t\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}}\right)$

Zur ersten Ordnung in  $\delta^2$ :

$$P_{fi} \approx \frac{4\delta^2}{\hbar^2\omega^2} \sin^2\left(\frac{t\omega}{2}\right) \quad \text{genau wie auf Seite 13!}$$

$$\omega = 0 \Rightarrow P_{fi} = \sin^2\left(\frac{t\delta}{\hbar}\right) \quad ; \quad \frac{d}{dt} |g(t)|^2 = \frac{\delta}{\hbar} \sin\left(\frac{2t\delta}{\hbar}\right)$$



Fazit:

- \* Bei diskreten Endzuständen funktioniert zeitabhängige Störungstheorie nur bei endlichen (kleinen) Zeitintervallen.
- \* Bei kontinuierlichen Endzuständen ist die Fermi-Regel in Ordnung, falls  $\delta(E_f - E_i)$  durch  $dN_f/dE_f|_{E_f=E_i}$  ersetzt wird.